

MOŽNOSTI UPLATNĚNÍ VIRIÁLNÍ STAVOVÉ ROVNICE PRO STANOVENÍ FYZIKÁLNÍCH VLASTNOSTÍ PLYNŮ PŘI MATEMATICKÉM MODELOVÁNÍ POŽÁRŮ

POSSIBILITIES OF APPLYING THE VIRIAL STATE EQUATION FOR OBTAINING PHYSICAL PROPERTIES OF REAL GASES IN MATHEMATICAL FIRE MODELS

Anotace

Príspevok obsahuje podklady pro uplatnění viriální stavové rovnice při získávání fyzikálních vlastností reálných plynů v matematických modelech požáru.

Abstract

The contribution presents foundations for applying the virial state equation for obtaining physical properties of real gases in mathematical fire models.

Keywords: mathematical fire model, virial state equation, physical properties of gases

Úvod

S růstem výrobních kapacit, zvyšováním energetického potenciálu a zaváděním nových technologií, vyznačujících se mnohdy extrémními pracovními podmínkami, zvětšují se rizika vzniku havárií doprovázených požáry. Mimořádné události často ohrožují zdraví lidí a působí vysoké škody v ekonomické sféře.

S pravděpodobností vzniku a rozšíření požáru se počítá již v projektové dokumentaci staveb. Požární bezpečnost je zajišťována plněním řady dílčích norem zaměřených na konkrétní problémy. Tyto normy se upravují nejen v návaznosti na nové vědecko technické poznatky, ale i v souvislosti s rozvojem výpočetní techniky a s tím související informace, dnes již běžně získávané matematickým modelováním požáru.

V vývoji výpočetních programů pro modelování požáru jsou patrné dva směry:

- a) Vytváření řady dílčích programů popisujících jednotlivé jevy požáru. Sjednocováním takovýchto modelů se vytváří komplexnější modely.
- b) Použití univerzálních výpočetních programů, určených nejen pro bezpečnostní inženýrství, ale i např. pro strojírenství, chemický průmysl a energetiku.

Zatímco dílčí programy pro matematické modelování požáru se stále více rozšiřují v oblasti požárně bezpečnostního inženýrství, univerzální programy jsou pro svou náročnost využívány dosud jen v oblasti výzkumu a vývoje.

V souvislosti se zajištěním požární bezpečnosti staveb je pro volbu konkrétních modelů rozhodující, aby byla ověřena správnost výpočtu. Přesnost výsledků modelováním se řeší již v průběhu vývoje modelů.

Stěžejními problémy při vývoji matematických modelů požárů jsou znalost fyzikálních vlastností látek a jejich kvalifikované zavedení do programu.

¹ Ing., Masarykova univerzita, Žerotínovo nám. 9, 601 77 Brno, e-mail: srutek@rect.muni.cz

Nejvíce se uplatňují vlastnosti termodynamické a transportní, charakterizující přenos hmoty, hybnosti a tepelné energie.

Vývoj metodik pro stanovení fyzikálních vlastností plynů, vhodných z hlediska matematického modelování požáru, souvisí jednak s rozvojem výpočetní techniky a jednak s tvorbou nových matematických modelů ve strojírenství, v chemickém průmyslu a v energetice.

Oprávněnost užití fyzikálních vlastností látek, vstupujících do matematického modelování požáru, kontroluje se již při tvorbě modelů, a to hlavně s ohledem na podmínky, za kterých byly naměřeny nebo získány [6].

Vzhledem ke specifčnosti fyzikálních procesů při hoření by software pro stanovení vlastností plynů z výchozích měření měl umožňovat jejich výpočet při velmi nízkých tlacích a v širokém rozsahu teplot, a zároveň respektovat, že proudění plynů významně ovlivňují i nepatrné změny teplot a tlaků.

Ještě dnes je značná část potřebných fyzikálních parametrů látek uváděna pouze ve formě tabulek nebo grafů, tj. ve formách nevhodných pro matematické modelování. Experimentálně a praxí ověřené tabulkové hodnoty fyzikálních vlastností se však stávají vhodným zdrojem pro regresní analýzu [5].

Pro sestavení jednotné metodiky výpočtu a výpočet fyzikálních vlastností plynů v matematických modelech požáru se může výhodně uplatnit viriální stavová rovnice.

Stavová rovnice skutečných (reálných) plynů

Stavovou rovnicí pro reálný plyn se rozumí vztah, vyjadřující souvislost veličin p , v , T v rovnovážné termodynamické soustavě a umožňující, řešením příslušných diferenciálních rovnic termodynamiky, vypočítat s dostatečnou přesností tepelné charakteristiky plynů (tepelné kapacity, vnitřní energii, entalpii, entropii).

Skutečné plyny se stavovou rovnicí ideálních plynů přesně neřídí. Rozdíly v chování reálných a ideálních plynů částečně vysvětluje Van der Waalova stavová rovnice, která respektuje konečný objem molekul a existenci přitažlivých sil mezi nimi. Tato rovnice má tvar

(1)

$$\left(p + \frac{a}{v^2}\right)(v - b) = r \cdot T ,$$

kde a , b jsou konstanty závislé na druhu plynu, r je měrná plynová konstanta. Ve tvaru (1) platí rovnice pro 1 kg plynu.

Izoterma v diagramu $p-v$ má v kritickém bodě inflexní bod. Proto platí

$$\left. \begin{aligned} \left(\frac{\partial p}{\partial v} \right)_T^{v_{kr}} &= 0 \\ \left(\frac{\partial^2 p}{\partial v^2} \right)_T^{v_{kr}} &= 0 \\ (2) \end{aligned} \right\}$$

$$\left(\frac{\partial^3 p}{\partial v^3} \right)_T^{v_{kr}} \neq 0$$

Konstanty a , b stanovené z prvních dvou vztahů (2) lze vypočítat z výrazů (3)

$$\left. \begin{aligned} a &= \frac{27}{64} \cdot \frac{R^2 \cdot T_{kr}^2}{p_{kr}} \\ b &= \frac{v_{kr}}{3} \end{aligned} \right\} \quad (3)$$

kde p_{kr} , v_{kr} , T_{kr} jsou termodynamické veličiny popisující stav plynu v kritickém bodě.

Konstanty a , b lze stanovit i z experimentálně zjištěných hodnot p , v , T plynu.

Van der Waalsova rovnice sice vystihuje chování reálných plynů přesněji a ve větším rozsahu teplot a tlaků než stavová rovnice ideálních plynů, ale výsledky z ní získané stále ještě vykazují značné odchylky od naměřených hodnot, a to zejména za nízkých teplot a za vysokých tlaků.

Stavových rovnic, teoreticky podložených a modifikovaných pro velké množství technicky důležitých plynů, byla v minulosti sestavena celá řada, přičemž tyto rovnice jsou tím složitější, čím je požadována vyšší přesnost a čím širší jsou oblasti teplot a tlaků [1]. Proto v technických výpočtech tyto rovnice mají jen omezené použití. Přibližně v polovině minulého století byla pomocí statistiky vytvořena obecná stavová rovnice pro reálný plyn, tzv. viriální stavová rovnice, která má podle [2] tvar:

$$p \cdot v = r \cdot T \left(1 - \sum_{k=1}^{\infty} \frac{k}{k+1} \cdot \frac{\beta_k}{v^k} \right), \quad (4)$$

kde β_k jsou koeficienty závislé pouze na teplotě (tzv. viriální koeficienty),

$$\sum_{k=1}^{\infty} \frac{k}{k+1} \cdot \frac{\beta_k}{v^k}$$

je mocninná řada v mocninách proměnné v^{-1} .

Viriální koeficienty β_k se pro určitý počet členů mocninné řady určují z empiricky získaných dat nebo z tabulkových hodnot regresní analýzou.

Rozvoj (4) lze s uvažováním vztahu $v^{-1} = \rho$ přepsat podle [3] ve tvaru

(5)

$$\frac{p}{\rho} = A_0 + A_1 \cdot \rho + \dots + A_n \cdot \rho^n = \sum_{i=0}^n A_i \cdot \rho^i ,$$

kde A_0, A_1, \dots, A_n jsou koeficienty závislé pouze na teplotě.

Výraz na pravé straně rovnice (5) je mocninnou řadou proměnné ρ .

Z porovnání rovnic (4) a (5) je patrné, že první viriální koeficient A_0 je roven $r \cdot T$.

Při $v \rightarrow \infty$ všechny členy mocninné řady v rovnici (4) se blíží k 0 a tato rovnice dostává tvar

(6)

$$p \cdot v = r \cdot T ,$$

což je stavová rovnice pro 1 kg ideálního plynu.

Význam druhého viriálního koeficientu lze objasnit ze vztahu

(7)

$$\left[\frac{\partial \left(\frac{p}{\rho} \right)}{\partial \rho} \right]_T^{\rho=0} = A_1 .$$

Jedná se o sklon izoterm v diagramu $\frac{p}{\rho} = f(\rho)$ v bodě osy $\rho = 0$.

Jestliže

(8)

$$\left[\frac{\partial \left(\frac{p}{\rho} \right)}{\partial \rho} \right]_T = 0 ,$$

je tečna izoterm, vycházející z osy $\rho = 0$, vodorovná přímka. Jedná se o bod izoterm ideálního plynu.

V některých případech je výhodné používat stavovou rovnici s bezrozměrnými, redukovanými proměnnými.

Viriální stavová rovnice s redukovanými proměnnými má dle [4] tvar

(9)

$$\frac{\sigma(\omega, \tau)}{\tau} = 1 + \omega \sum_{i=0}^n B_i \left(\frac{1}{\tau} \right)^i + \omega^2 \sum_{i=0}^n C_i \left(\frac{1}{\tau} \right)^i + \dots ,$$

kde

$$\omega = \frac{\rho}{\rho_k} \quad \text{– redukovaná veličina hustoty}$$

$$\tau = \frac{T}{T_k} \quad \text{– redukovaná veličina teploty}$$

$$\sigma(\omega, \tau) \text{ – redukovaný parametr, } \sigma(\omega, \tau) = \frac{p}{r \cdot \rho_k \cdot T_k \cdot \omega}$$

$$B_i, C_i, \dots \quad \text{– konstanty aproximačních polynomů}$$

$$T_k(\rho_k) \quad \text{– kritická teplota (kritická hustota)}$$

V rovnici (9) jsou viriální koeficienty u nezávisle proměnné ω vyjádřeny polynomy proměnné τ^{-1} .

Podle [4] obecná stavová rovnice pro plyn má tvar

(10)

$$\sigma(\omega, \tau) = a_0(\omega) + a_1(\omega) \cdot \tau + \beta(\omega) \cdot \psi(\tau) + \gamma(\omega) \cdot \varphi(\tau) ,$$

kde

$$a_0(\omega) = \sum_{i=1}^n a_i \cdot \omega^i$$

$$a_1(\omega) = 1 + a_{11}(\omega) = 1 + \sum_{i=1}^n b_i \cdot \omega^i$$

$$\beta(\omega) = \sum_{i=1}^n c_i \cdot \omega^i$$

$$\gamma(\omega) = \sum_{i=1}^n d_i \cdot \omega^i$$

$$\psi(\tau) = \sum_{i=1}^n \frac{l_i}{\tau^i}$$

$$\varphi(\tau) = \sum_{i=1}^n \frac{f_i}{\tau^i}$$

$$\sigma(\omega, \tau) = \frac{p}{r \cdot \rho_k \cdot T_k \cdot \omega}$$

$$\omega = \frac{\rho}{\rho_k}$$

$$\tau = \frac{T}{T_k}$$

$a_i, b_i, c_i, d_i, l_i, f_i$ jsou aproximační koeficienty.

Pro tuto stavovou rovnici jsou v [4] uvedeny vztahy pro určení měrných tepelných kapacit, vnitřní energii, entalpii a entropii, získané z diferenciálních rovnic termodynamiky a také koeficienty aproximačních polynomů této rovnice pro vzduch a jeho některé komponenty.

Stavová rovnice (10) není obecně viriální, neboť se v ní vyskytují dva členy, sestávající ze součinu dílčích polynomů

$$\beta(\omega) \cdot \psi(\tau) \text{ a } \gamma(\omega) \cdot \varphi(\tau)$$

Jestliže ve stavové rovnici (10) zvolíme

$$\left. \begin{aligned} \psi(\tau) &= \tau^{-1} \\ \varphi(\tau) &= \tau^{-2} \end{aligned} \right\} \quad (11)$$

bude tato rovnice mít tvar

$$\sigma(\omega, \tau) = a_0(\omega) + a_1(\omega) \cdot \tau + \beta(\omega) \cdot \tau^{-1} + \gamma(\omega) \cdot \tau^{-2} \quad (12)$$

a bude viriální.

Pro rovnici (12) lze stanovit aproximační koeficienty dílčích polynomů, a to na základě tabulkových nebo naměřených a zpracovaných hodnot, použitím metody nejmenších čtverců, aplikované na funkci dvou a více proměnných a pro výpočet tepelných vlastností využít metodiku uvedenou v [4].

Pro výpočet dynamické viskozity a tepelné vodivosti reálných plynů lze použít dle [4] vztahů, sestavených jako součty dvou polynomů, a to s proměnnými T a ρ .

Pro dynamickou viskozitu platí

(13)

$$\eta(p, T) = \eta(T) + \eta(\rho) = \sum_{i=0}^n B_i \cdot \left(\frac{T}{100} \right)^i + \sum_{i=0}^n C_i \cdot \rho^i$$

a pro tepelnou vodivost platí vztah

(14)

$$\lambda(p, T) = \lambda(T) + \lambda(\rho) = \sum_{i=0}^n D_i \cdot \left(\frac{T}{100} \right)^i + \sum_{i=0}^n E_i \cdot \rho^i$$

Ze vztahů (13) a (14) je patrné, že pro $\rho \rightarrow 0$ jsou dynamická viskozita i tepelná vodivost reálných plynů závislé pouze na teplotě.

Koeficienty polynomů B_i , C_i , D_i , E_i lze stanovit také z tabulkových nebo experimentálních hodnot metodou nejmenších čtverců aplikovanou na funkci dvou proměnných.

Závěr

Rozvoj výpočetní techniky umožňuje, v oblasti matematického modelování požáru, intenzivněji využívat teoretické poznatky fyzikálních a chemických procesů při hoření, pohybu zplodin a do výpočtu zahrnovat reakce objektu, činnost osob a požárně bezpečnostního zařízení. V matematických modelech požáru jsou uplatňovány nejnovější vědecké poznatky, a to nejen z vědního oboru požární bezpečnost staveb a technologií, ale i z termomechaniky, hydromechaniky, matematiky a dalších vědních oborů.

Úspěch modelování fyzikálních a chemických procesů při požárech závisí, do značné míry, na možnostech řešitele získat kvalitní fyzikální vlastnosti zúčastněných medií. Základním vztahem pro jejich získání je stavová rovnice reálných plynů.

Jako vhodná se ukazuje viriální stavová rovnice, a to nejen pro popis závislosti mezi veličinami p , v , T , ale i pro výpočet, pomocí diferenciálních rovnic termodynamiky, tepelných i transportních vlastností plynů.

Přednosti použití této rovnice lze shrnout následovně:

- zajištění v širokém rozsahu parametrů dostatečné přesnosti závislosti mezi veličinami p , v , T volbou vhodných stupňů polynomů;
- využití jednotné metodiky výpočtu tepelných a transportních vlastností pro jednotlivé složky směsi plynů;
- možnost výpočtu koeficientů rovnic pro čisté plyny i jejich směsi regresní analýzou na základě tabulkových nebo experimentálních hodnot.

Literatura

- [1] Sazima, M. aj.: *Teplo*. Praha, SNTL, 1989
- [2] Kirillin, V., A. aj.: *Techničeskaja tĕrmodinamika*. Moskva, 1983
- [3] Reid, R., C., aj.: *The Properties of Gases and Liquids Fourth Edition*. McGraw-Hill, 1987
- [4] Vasserman, A. A. aj.: *Tĕpfizičeskie svojstva vozducha i jevo komponĕntov*. Moskva, 1966
- [5] Šrůtek, J.: *Fyzikální vlastnosti tekutin a jejich vyjádření pro matematické modelování požáru*. Brno, 2008, 34 s.

- [6] Kučera,P., Mikloš, J.: *Zásady při ověřování matematických modelů požáru*. Sborník vědeckých prací VŠB-TU Ostrava, Řada bezpečnostní inženýrství. Ostrava: SPBI, 2008, s. 47-56